

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ PG-5 В РАСТВОРЕ С МИЦЕЛЛАМИ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Колосова О.А., Усачёв К.С., Клочков В.В.

Институт физики, КФУ, Казань, Россия

*kolosova.olga11@gmail.com*

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) высокого разрешения одна из наиболее информативных методик для определения пространственной структуры и динамики биомолекул в растворе. В данной работе с помощью спектроскопии ЯМР нами была определена структура протегрина 5 (PG-5) - антимикробного пептида, который способен образовывать олигомеры, вызывающие лизис клеток путем образования трансмембранных пор (Рис.1).



Рисунок 1. – Аминокислотная последовательность PG-5.

Целью данной работы является определение пространственной структуры PG-5 в растворе в комплексе с системами, имитирующими поверхность клеточной мембраны (мицеллы додецилфосфохолина, ДФХ) и нахождение общих закономерностей формирования трансмембранных пор. Установлено, что исследуемый пептид в растворе с мицеллами ДФХ образует  $\beta$ -складку (Рис.2А), также показана возможность димеризации и дальнейшей олигомеризации PG-5 (Рис.2В) и предположена модель о поэтапном образовании трансмембранной поры [1].

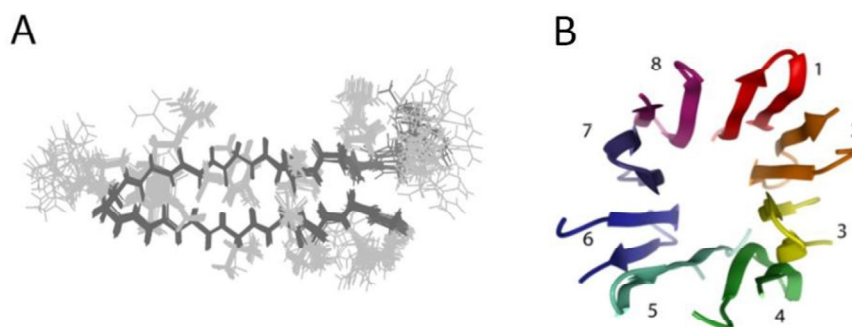


Рисунок 2. – А) Ансамбль из 20 структур с минимальной энергией для мономера PG-5; В) Олигомер PG-5.

1. K.S. Usachev, O.A. Kolosova, E.A. Klochkova, A.R. Yulmetov, A.V. Aganov, V.V. Klochkov  
Oligomerization of the antimicrobial peptide Protegrin-5 in a membrane-mimicking environment. Structural studies by high-resolution NMR spectroscopy, *Eur Biophys J Biophys.*, 2016. DOI 10.1007/s00249-016-1167-5.